

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Was ist Computerphysik?.....	2
1.2	Entwicklung der Computerphysik	3
1.3	Inhalt der Computerphysik	4
1.4	Computersimulationen und wissenschaftliches Rechnen	5
 Teil I Computergrundlagen		
2	Hard- und Software	9
2.1	Hardware	10
2.2	Software	11
2.2.1	Betriebssysteme	11
2.3	Das Betriebssystem Linux.....	13
2.3.1	Historische Entwicklung von Linux	13
2.3.2	Die Philosophie von UNIX/Linux	14
2.3.3	GNU-Projekt	14
2.3.4	Linux-Distribution	15
2.3.5	Grafische Oberfläche	15
2.3.6	Terminal	15
	Aufgaben	16
3	Datenspeicherung	19
3.1	Speichermengen und Entwicklung	20
3.2	Speichertechniken	22
3.2.1	Wichtigste Speichertechnologien	22
3.2.2	Verwaltung von Datenspeichern	25
3.3	Partitionen und Dateisysteme	28
3.3.1	Dateisysteme	28
3.3.2	Dateien	30
3.4	Datenformate und -codierung	31
3.4.1	Daten- und Dateiformate für Forschungsdaten	32
	Aufgaben	33

4	Arbeiten mit Linux	35
4.1	Die Shell	35
4.1.1	Shell-Kommandos	36
4.1.2	Shell-Variablen und -Aliasse	37
4.1.3	Jobverwaltung	37
4.1.4	Shell-Expansion und Tastaturkürzel	39
4.2	Das Dateisystem	39
4.2.1	Wichtige Verzeichnisse	41
4.2.2	Dateisystem – konkret	41
4.2.3	Zugriffsrechte	42
4.2.4	Ein- und Ausgabeumlenkung	43
4.3	Nutzende und Prozesse	44
4.3.1	Nutzerverwaltung	44
4.3.2	Prozesse	44
	Aufgaben	46
 Teil II Programmieren und Datenverarbeitung		
5	Programmieren in C	51
5.1	Grundlagen der Programmierung	52
5.2	Einführung in C	53
5.2.1	Eigenschaften von C	53
5.2.2	„Hallo Welt!“	54
5.2.3	„Hallo Welt!“-Programm erklärt	55
5.2.4	C-Variablen und -Operatoren	56
5.2.5	Datentypen von C	57
5.2.6	Bedingungen	59
5.2.7	Schleifen	61
5.2.8	Funktionen	61
5.3	C für Fortgeschrittene	63
5.3.1	Zeichen(ketten) und Felder	63
5.3.2	Zusammengesetzte Datentypen	64
5.3.3	Zeiger	65
5.3.4	Dynamische Speicherverwaltung	66
5.4	Hilfsmittel für die Programmierung	68
5.4.1	Kompilieren	68
5.4.2	Fehlersuche	70
	Aufgaben	71
6	Programmieren in Python	73
6.1	Allgemeine Informationen zu Python	74
6.2	Die Programmiersprache Python	74
6.2.1	IDEs und Jupyter Notebooks	75
6.2.2	Variablen und Datentypen	76
6.2.3	Kontrollstrukturen	78
6.2.4	Funktionen	80

6.2.5	Eingabe und Dateien	80
6.3	Python-Bibliotheken	81
6.3.1	SymPy	83
6.3.2	Multiprocessing-Bibliothek	83
	Aufgaben	84
7	Wissenschaftliches Rechnen	85
7.1	Wissenschaftliche Programmierung	85
7.1.1	Softwareengineering	86
7.1.2	Datenstrukturen	88
7.2	Wichtige Algorithmen und Bibliotheken	90
7.2.1	Softwarebibliotheken	92
7.3	GUI-Programmierung	95
7.4	Integrierte Umgebungen und Computeralgebrasysteme	96
7.4.1	Mathematica	96
7.5	Versionsverwaltung	97
7.5.1	Git	98
	Aufgaben	100
8	Arbeiten mit Daten	103
8.1	Dateien und Verzeichnisse	104
8.1.1	Verzeichnisstruktur	104
8.1.2	Dateibenennung und Metadaten	105
8.1.3	Prüfsummen	106
8.1.4	Komprimierung	107
8.1.5	Archivierung	110
8.2	Umgang mit Daten	112
8.2.1	Datensicherung	112
8.2.2	Versionsverwaltung von Daten	113
8.3	Netzwerk und Datenaustausch	115
8.3.1	Das OSI-Schichtenmodell	115
8.3.2	Wichtige Dienste	117
8.3.3	SSH	117
8.4	Daten präsentieren	118
8.4.1	Grafische Darstellung von Daten	119
8.4.2	Programme zur Datendarstellung	121
8.5	Forschungsdaten in der Wissenschaft	124
8.5.1	Wissenschaft und gute wissenschaftliche Praxis	126
8.5.2	Open Science	127
8.5.3	Forschungsdatenmanagement (FDM)	129
	Aufgaben	131
9	Hochleistungsrechnen	133
9.1	Optimierung von Programmen	133
9.1.1	Profiling	134
9.2	Parallele Programmierung	135

	9.2.1	Vektorisierung	136
	9.2.2	OpenMP	137
	9.2.3	MPI	138
9.3		HPC-Cluster	141
	9.3.1	HPC-Hardware	141
	9.3.2	HPC-Systeme	141
	9.3.3	Speedup	144
	9.3.4	Nutzung von HPC-Clustern	145
		Aufgaben	145
 Teil III Numerische Methoden			
10		Zahlendarstellung und numerische Fehler	149
10.1		Darstellung von Zahlen	149
	10.1.1	Fließkommadarstellung	151
	10.1.2	Darstellung einer Dezimalzahl nach IEEE 754	152
	10.1.3	Fließkommaarithmetik	153
10.2		Numerische Fehler	153
	10.2.1	Diskretisierung	153
	10.2.2	Methode der kleinen Schritte	155
		Aufgaben	156
11		Numerische Standardverfahren	159
11.1		Näherung von Ableitungen	159
11.2		Nullstellensuchverfahren	161
	11.2.1	Intervallhalbierung (Bisektion)	161
	11.2.2	Newton-Raphson-Verfahren	162
	11.2.3	Sekantenverfahren	163
	11.2.4	False-Position-Verfahren (<i>regula falsi</i>)	163
	11.2.5	Weitere Verfahren	164
11.3		Interpolation	164
	11.3.1	Lineare Interpolation	165
	11.3.2	Polynominterpolation	165
	11.3.3	Spline-Interpolation	168
11.4		Fourier-Analyse	168
	11.4.1	Fourier-Transformation	171
	11.4.2	Diskrete Fourier-Transformation	172
	11.4.3	Faltung	172
	11.4.4	Auto- und Kreuzkorrelation	174
11.5		Numerische Integration	175
	11.5.1	Newton-Cotes-Formeln	175
	11.5.2	Gauß-Quadratur	181
11.6		Methode der kleinsten Quadrate	183
	11.6.1	Lineare Anpassung (Regression)	184
	11.6.2	Polynomregression	185
		Aufgaben	186

12	Numerik von gewöhnlichen Differenzialgleichungen	189
12.1	Euler-Verfahren	189
12.1.1	Genauigkeit des expliziten Euler-Verfahrens	190
12.1.2	Stabilität des expliziten Euler-Verfahrens	191
12.2	Runge-Kutta-Verfahren	191
12.3	Mehrschrittverfahren	193
12.4	Implizite Verfahren	194
12.5	Fortgeschrittene Verfahren	194
	Aufgaben	195
13	Verfahren der linearen Algebra	197
13.1	Lineare Gleichungssysteme	197
13.1.1	Exaktes Lösen von LGS	198
13.1.2	Iterative Lösung	200
13.1.3	Software	201
13.2	Eigenwertprobleme	202
13.2.1	Iteratives Lösen von Eigenwertproblemen	203
13.2.2	Software	205
13.3	Minimierungsmethoden	206
	Aufgaben	208
14	Zufallszahlen	209
14.1	Zufallszahlengeneratoren	210
14.1.1	Linearer Kongruenzgenerator	210
14.1.2	Mersenne-Twister	211
14.1.3	Verwendung	211
14.2	Zufallszahlenverteilungen	211
14.2.1	Inversionsmethode	212
14.2.2	Verwerfungsmethode	214
14.2.3	Normalverteilte Zufallszahlen	215
14.2.4	Implementierung	216
	Aufgaben	217

Teil IV Computerphysikprojekte

15	Der Oszillator	221
15.1	Physikalische Grundlagen	221
15.2	Numerische Lösung und Tests	222
15.2.1	Implementierung	223
15.2.2	Testen der Ergebnisse	224
15.3	Verbesserte numerische Lösungen	226
15.3.1	Mehrschrittverfahren	226
15.3.2	Leapfrog-Verfahren	227
15.3.3	Implizite Verfahren	228
15.4	Implementierung der verbesserten Verfahren	229
15.4.1	RK2-Verfahren für den harmonischen Oszillator	229

15.4.2	Die Heun-Methode für den gedämpften Oszillator	230
15.4.3	Verlet-Verfahren zur Lösung der allgemeinen Oszillatorgleichung.....	230
15.5	Auswertung und analytische Lösung	232
	Aufgaben	234
16	Nichtlineare Dynamik	237
16.1	Fraktale und Modellsysteme	238
16.1.1	Die logistische Abbildung	239
16.1.2	Die Mandelbrot-Menge	239
16.1.3	Der Ljapunow-Exponent	241
16.2	Das chaotische Pendel	245
16.2.1	Numerik	246
16.2.2	Auswertung	246
16.3	Seltsame Attraktoren	249
16.3.1	Der Lorenz-Attraktor.....	249
16.3.2	Der Rössler-Attraktor	250
	Aufgaben	251
17	Randwertprobleme	255
17.1	Numerow- und <i>Shooting</i> -Methode	255
17.1.1	Herleitung des Numerow-Verfahrens.....	256
17.1.2	Einfaches Beispiel.....	256
17.1.3	Die radiale Poisson-Gleichung	257
17.1.4	Die stationäre Schrödinger-Gleichung	258
17.1.5	<i>Shooting</i> -Methode für den harmonischen Oszillator ...	262
17.2	Relaxationsmethoden	263
17.2.1	Beispiel	265
17.2.2	Verbesserte Verfahren	265
	Aufgaben	268
18	Anfangswertprobleme.....	271
18.1	Die Diffusionsgleichung.....	271
18.1.1	FTCS- und BTCS-Verfahren.....	272
18.1.2	Fehlerabschätzung des FTCS-/BTCS-Verfahrens	273
18.1.3	Crank-Nicolson-Verfahren	274
18.1.4	Stabilitätsanalyse	275
18.1.5	Zweidimensionale Diffusion.....	278
18.1.6	Ausblick	279
18.2	Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung	279
18.2.1	Modenzerlegung.....	279
18.2.2	Numerische Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung	280
18.2.3	Beispiel: Zeitentwicklung eines Gauß-Paketes	282
18.3	Die Wellengleichung	284
18.3.1	Numerische Lösung der advektiven Gleichung	285

18.3.2	Lax-Wendroff-Verfahren	286
18.3.3	Implementierung	288
	Aufgaben	289
19	Eigenwertprobleme	291
19.1	Diagonalisierung	292
19.2	Eigenschwingungen	292
19.3	Anwendungen in der Quantenmechanik	293
19.3.1	Der anharmonische Oszillator	293
19.3.2	Das Doppelmuldenpotenzial	294
19.3.3	Magnetfeldaufspaltung	296
	Aufgaben	297
20	Daten- und Signalanalyse	299
20.1	Statistische Methoden	299
20.1.1	Binomialverteilung	300
20.1.2	Poisson-Verteilung	304
20.1.3	Kontinuierliche Verteilungen	305
20.2	Datenanpassung	310
20.2.1	Maximum-Likelihood-Methode	310
20.2.2	Polynomapproximation einer Funktion	311
20.2.3	Nichtlineare Anpassung	312
20.3	Signal- und Bildanalyse	313
20.3.1	Frequenzanalyse	314
20.3.2	Fourier-Filter und Anwendungen	316
20.3.3	Anwendungen der Faltung	318
20.3.4	Bildanalyse	319
	Aufgaben	323
21	Stochastische Methoden	327
21.1	Monte-Carlo-Integration	327
21.1.1	Beispiel: Bestimmung von π	328
21.1.2	Anwendungen	329
21.1.3	Importance Sampling	329
21.2	Random Walk	331
21.3	Zelluläre Automaten	332
21.3.1	Elementarer Zellulärer Automat	333
21.3.2	Game Of Life	334
21.3.3	Weitere Beispiele	334
21.4	Perkolationstheorie	335
	Aufgaben	336
A	Shell-Kommandos unter Linux	339
B	Funktionen der C-Standardbibliothek	343
C	Lösungen	347
	Stichwortverzeichnis	393